

Optische Transformationsmatrix inhomogener dünner Schichten

Keßler, Franz Rudolf

Veröffentlicht in:
Abhandlungen der Braunschweigischen
Wissenschaftlichen Gesellschaft Band 38, 1986,
S.203-227



Verlag Erich Goltze KG, Göttingen

Optische Transformationsmatrix inhomogener dünner Schichten

Von **Franz Rudolf Keßler**, Braunschweig

(Eingegangen am 8.12.1986)

Prof. Dr. C. v. Fragstein, Saarbrücken, zum 80. Geburtstag gewidmet.

Kurzfassung

Bei gegebener optischer Inhomogenität in den beiden optischen Konstanten zwischen zwei „unendlich ausgedehnten“ Medien wird das optische Reflexions- bzw. Transmissionsvermögen bezüglich des meßbaren Strahlungsflusses bestimmt durch eine „resultierende Matrix“, in der alle Parameter in Bezug auf Qualität und Quantität der beliebigen optischen Inhomogenität ihren relevanten Ausdruck finden. Die Methode der Inhomogenitätsdarstellung mit Hilfe der Matrizenrechnung wird hier bezüglich der Umkehrbarkeit und Eindeutigkeit der Darstellung diskutiert. Es wird demnach ein Verfahren angegeben, aus den Meßwerten von Transmission und Reflexion die resultierende Matrix zu gewinnen. Es zeigt sich, daß zur Bestimmung der relevanten sechs Parameter der vier komplexen Matrizenkoeffizienten Meßwerte vorliegen müssen, die sich auf Transmission und Reflexion bei jeweils zwei unterschiedlichen „Abschlußmedien“ der „Profilplatte“ beziehen. Die Lösungsmethode und die Eindeutigkeits- bzw. Genauigkeitsfragen werden diskutiert. Im Resultat werden die Meßwerte mit einer Abweichung kleiner als 0.035% reproduziert. Die Erörterung bezieht sich dabei insbesondere auf das Problem, in Halbleitern ein Tiefenprofil in den optischen Konstanten, gegeben z.B. durch einen inhomogenen Verlauf der Konzentration freier Ladungsträger, durch zerstörungsfreie optische Messung zu bestimmen. Dabei ist zu berücksichtigen, daß bei entsprechend großen Gradienten in den optischen Konstanten die sogen. geometrisch-optische Näherung bei der Behandlung der Ausbreitung der elektromagnetischen Welle nicht mehr verwendbar ist.

I. Einleitung

Die Transmission und Reflexion einer elektromagnetischen Welle bei dem Übergang von einem homogenen Medium in ein anderes hängt nicht nur von den dielektrischen Eigenschaften dieser beiden Medien ab, sondern wird auch bestimmt von den Zwischenmedien und deren geometrischer Konfiguration. Die folgenden Ausführungen befassen sich mit dem Problem, aus den experimentell bestimmten und auf die Strahlungsflüsse bezogenen Werten des Transmissionsvermögens T und des Reflexionsvermögens R diejenige Größe zu bestimmen, die das diesbezügliche Ausbreitungsverhalten der Welle eindeutig charakterisiert. Die dabei vorliegende geometrische Kon-

figuration der Zwischenmedien kann beliebig sein bis hin zur Variation der komplexen Dielektrizitätskonstanten (DK) im Sinne einer kontinuierlichen Inhomogenität.

Da sich die Problemstellung aus der auch anwendungsbezogenen Diskussion des optischen Verhaltens von inhomogen dotierten Halbleiterstrukturen ergeben hat, wird von „optischer Inhomogenität“ gesprochen. Dies bedeutet jedoch insofern keine Einschränkung der Allgemeinheit, als die Ergebnisse nicht nur auf elektromagnetische Wellen anderer Frequenzlage, sondern auch auf beliebige Wellenausbreitungsvorgänge übertragbar sind, soweit es sich, wie hier generell vorausgesetzt, um einen in der Amplitudenabhängigkeit „linearen“ Ausbreitungsvorgang handelt, der also die Gültigkeit des Superpositionsprinzips garantiert. Anders wären auch keine Stoffparameter im Sinne von „Konstanten“ (DK bzw. „optische Konstanten“) definiert.

Die vorliegenden Betrachtungen erfassen jedoch speziell die Situation der Wellenausbreitung in inhomogenen Strukturen, in denen relativ große Gradienten in den optischen Konstanten existieren. Relativ groß bedeutet dabei, daß die mathematische Behandlung des Wellenausbreitungsvorganges in der sogen. „geometrisch-optischen Näherung“ nicht mehr möglich ist, die diesbezügliche Relation (1)

$$\begin{aligned} \text{Bedingung für die geometrisch-} & \quad \frac{c}{\omega} \left| \frac{1}{(\tilde{n})^2} \text{ grad } \tilde{n} \right| \ll 1 \\ \text{optische Näherung:} & \\ \tilde{n} = (n - ik) = & \text{komplexer Brechungsindex} \end{aligned} \quad (1)$$

also nicht in allen Materialbereichen gültig ist.

Die physikalischen Konsequenzen und Möglichkeiten der mathematischen Behandlung dieses Sachverhaltes sind an anderer Stelle ausführlich abgehandelt worden [1,2]. Dazu wurden dort auch experimentelle Verifizierungen vorgestellt und entsprechende Literaturhinweise, einschließlich einiger Verweise auf das Problem der „Reziprozität“, gegeben. Um hier Wiederholungen zu vermeiden, sei ausdrücklich auf diese beiden Arbeiten verwiesen.

Die Methodik der Behandlung der Wellenausbreitung in inhomogenen bzw. geschichteten Medien stützt sich auf die Vierpoltheorie bzw. Matrizenrechnung, wie sie insbesondere in der Lösung elektrotechnisch analoger Probleme der Netzwerktheorie üblich ist [3]. Bezüglich der Ausbreitung frei laufender Wellen in Materie bedeutet dies zunächst jedoch eine Beschränkung auf ein „ebenes Problem“. In diesem Sinne soll sich das Licht im Folgenden stets mit hinreichender Näherung parallel zum Inhomogenitätsgradienten und damit auch geradlinig (dies sei hier die z-Richtung) ausbreiten. Andererseits soll die Materie senkrecht dazu eine hinreichende Ausdehnung besitzen, so daß Beugungserscheinungen an den Begrenzungen entfallen.

Zu den Voraussetzungen gehört auch die Festlegung, daß das „Herkunftsmedium“ und das „Abschlußmedium“ jeweils unendlich ausgedehnt sind bzw. von deren rückwärtiger Begrenzung keine reflektierten Strahlungsanteile auftreten. Gleichmaßen sind Lichtquelle und Detektor bei der experimentellen Messung jeweils rückwirkungs-frei und in ihren Parametern unbeeinflusst vorausgesetzt.

Das vorliegende Problem reduziert sich damit auf den Sachverhalt, die resultierende Matrix zu bestimmen, die das Ausbreitungsverhalten des Lichtes durch die ebene, jedoch inhomogene Materiestruktur zwischen den (bekannten) Medien beschreibt, die als Herkunfts- bzw. Abschlußmedium fungieren. Die Aufgabe ist dabei nicht die Berechnung der resultierenden Matrix bei bekannter Inhomogenitätsstruktur $\tilde{n}(z)$, denn dies ist mit Hilfe der Matrizenmethode bei gegebener Frequenz approximativ hinreichend genau und eindeutig möglich. Die Aufgabe ist hier vielmehr die Lösung der Umkehrung, d.h. die Bestimmung der resultierenden Matrix aus den experimentell ermittelten Größen des Reflexions- und Transmissionsvermögens, die im Herkunfts- bzw. Abschlußmedium gemessen werden.

Wie zu zeigen sein wird, sind dabei sechs voneinander unabhängige reelle Koeffizienten zu bestimmen. Es ist einsichtig, daß dazu eine entsprechende Anzahl von unabhängigen Messungen notwendig ist, wobei die an die „Profilplatte“, als dem „Träger“ der Inhomogenität, angrenzenden Herkunfts- bzw. Abschlußmedien zu wechseln sind.

Mit der Bestimmung der resultierenden Matrix ist auch die Frage nach deren Eindeutigkeit verbunden. Ist die Antwort dazu befriedigend gegeben, so kann in einem weiteren, unabhängigen Schritt, der jedoch nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist, das Problem angegangen werden, die Ortsfunktion der optischen Konstanten $\tilde{n}(z)$ in der Inhomogenität selbst zu bestimmen. Es wurde bereits früher dazu ausgeführt, daß dies unter Ausnutzung der Spektralfunktionen von Reflexion und Transmission, d.h. hier unter Ausnutzung der Spektralfunktionen der Koeffizienten der resultierenden Matrix, möglich sein sollte, wenn die mikrophysikalischen Mechanismen der DK z.B. die Frequenz- und Konzentrationsabhängigkeiten miteinander eindeutig verknüpfen [2].

II. Matrizenkoeffizienten und Meßwerte verknüpft in Vektorgleichungen

Die „resultierende Matrix“ (RM) $||M||$ ist eine 2×2 -Matrix mit komplexen Koeffizienten \tilde{m}_{ij} . Die angestrebte Bestimmung der Koeffizienten läßt sich mit einem mathematischen Kalkül erreichen, daß sich auf eine Vektordarstellung dieser Koeffizienten in der x-y-Ebene stützt anstelle ihrer funktionentheoretischen Behandlung in der komplexen, d.h. Gaußschen Zahlenebene. Zugleich gewinnt die Darstellung damit ein gewisses Maß an „Anschaulichkeit“. Wenn sich z.B. die Koeffizienten ausschließlich in ihrem polaren Winkel verändern, bzw. mit konstanten Differenzen oder Summen auftreten, so entspricht dies einer Drehung des Vektors bzw. einer Translation mit Drehung des Differenz- oder Summenvektors. Der Übergang von Real- und Imaginärteil der \tilde{m}_{ij} zu den jeweiligen x- bzw. y-Komponenten und zurück ist trivial.

Um die Indizierung zu vereinfachen, sei für die resultierende Matrix (RM) folgende Schreibweise verabredet:

$$||M|| = \begin{vmatrix} \tilde{m}_{11} & \tilde{m}_{12} \\ \tilde{m}_{21} & \tilde{m}_{22} \end{vmatrix} \equiv \begin{vmatrix} u & v \\ w & x \end{vmatrix} \quad (2)$$

Die quantitativen Beziehungen für das Reflexionsvermögen, z.B. $R(1a \longrightarrow 2a)$, und

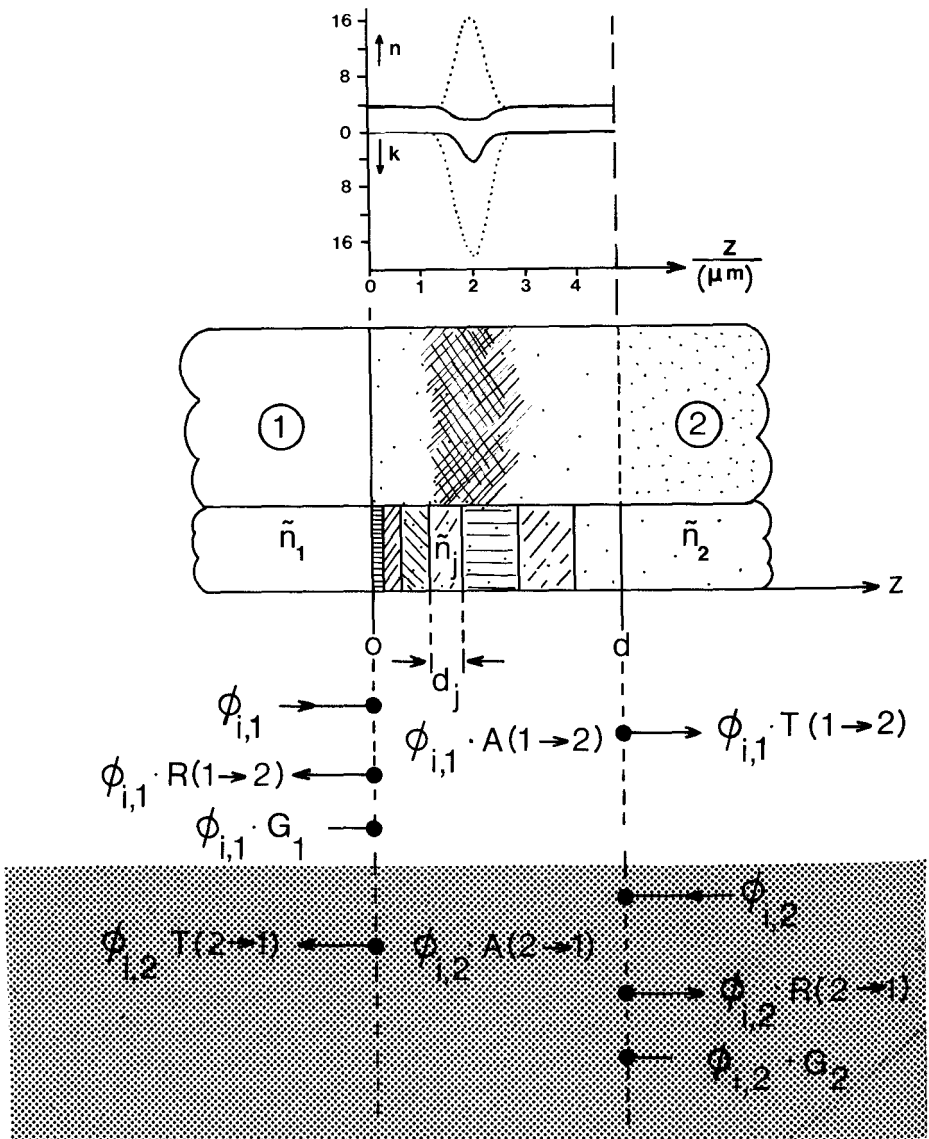


Abb. 1:

Skizze der optisch inhomogenen dünnen Schicht der Dicke d begrenzt von den unendlich ausgedehnten Medien „1“ und „2“. Die Graphen geben den Ortsverlauf von Brechungsindex n und Absorptionsindex k für das gewählte Beispiel eines Gauß-Dotierungsprofils mit Maximum $2\ \mu\text{m}$ unter der Oberfläche bei $z=0$ in Silizium an, wie es bei Ionenimplantation auftritt. Die Graphen gelten für die Vakuumwellenlängen $10\ \mu\text{m}$ (—) und $100\ \mu\text{m}$ (---). Abfallparameter der Gauß-Funktion ist: $\Delta z(1/e) = 0.3\ \mu\text{m}$. Die Parameter der freien Ladungsträger sind weiterhin: Maximale Trägerkonzentration $N(\text{max}) = 2.0 \cdot 10^{20}\ \text{cm}^{-3}$; Stoßzeit $\tau = 7.8 \cdot 10^{-15}\ \text{s}$; eff. Masse $m^* = 0.45\ m_0$. – Das vorliegende Rechenbeispiel bezieht sich auf $10\ \mu\text{m}$ Vakuumwellenlänge. Die Skizze erläutert zugleich die im Text benutzten Bezeichnungen für die Strahlungsflüsse.

das Transmissionsvermögen, z.B. $T(1a \longleftrightarrow 2a)$, sind in den Gl. (4) angegeben. Dazu ist zu bemerken:

1. Die Begrenzungsmedien und zugleich die Ausbreitungsrichtung der Welle sind mitbestimmend und müssen deshalb in der Größe R bzw. T eindeutig indiziert sein. In der Klammer ($1a \longrightarrow 2a$) gibt z.B. der Pfeil die Ausbreitungsrichtung von dem Herkunftsmedium „1a“ zum Abschlußmedium „2a“ an. Eine entsprechende Kennzeichnung erhält der Wellenwiderstand Z , z.B. in der Form $Z(2a)$, der das Herkunfts- bzw. Abschlußmedium charakterisiert. Diese Medien sollen, daß sei hier in Übereinstimmung mit der praktischen Relevanz einschränkend vorausgesetzt, nicht oder nur „schwach absorbierend“ sein. Dies bedeutet, daß der Wellenwiderstand praktisch als reell angenommen werden kann und für diese Medien auch der komplexe Brechungsindex praktisch reell ist. Da generell die relative magnetische Permeabilität gleich Eins gesetzt werden kann (speziell bei optischen Frequenzen, aber auch sonst bei nicht-ferromagnetischen Materialien), so gilt

$$\begin{array}{ll} \text{für Herkunfts-} & Z = Z_0 \frac{1}{n} \\ \text{bzw. Abschlußmedium:} & \end{array} \quad (3)$$

$$Z_0 = 120 \pi [\text{Ohm}] = \text{Wellenwiderstand des Vakuums.}$$

2. Für die eine Seite der Profilplatte, gekennzeichnet z.B. durch die Konzentration der Dotierung an dieser Stelle (hier bei $z=0$), wird für das angrenzende Medium stets die gleiche Indizierung „1“ gewählt, für die andere Seite (bei $z=d$) dann die (bleibende!) Indizierung „2“ (vgl. Abb. 1). Werden unterschiedliche angrenzende Medien verwandt, so erhalten diese eine Kennzeichnung durch die kleinen Buchstaben „a“, „b“ usw. Zusammen mit dem Richtungspfeil sind damit die angrenzenden Medien, die relative Stellung der Profilplatte und ihre Durchstrahlungsrichtung eindeutig gekennzeichnet.

3. Da Herkunfts- und Abschlußmedium nicht bzw. schwach absorbierend vorausgesetzt sind, gilt in jedem Fall das Reziprozitätsgesetz. D.h., das Transmissionsvermögen hängt nicht von der Durchstrahlungsrichtung der Profilplatte ab (vgl. dazu die Beweisführung, die weitere Diskussion und die Literaturhinweise in [1] bzw. [2]). Deshalb steht in der Indizierung des Transmissionsvermögens stets der Doppelpfeil bezüglich der Richtungsangabe, und eine weitere Unterscheidung entfällt.

Damit ergibt sich die folgende Darstellung für den quantitativen Zusammenhang zwischen Meßgrößen einerseits und den Matrizenkoeffizienten andererseits:

$$\begin{aligned} T(1 \longleftrightarrow 2) &= \left| \frac{2 \cdot Z_2}{(Z_2 u + v) + (Z_1 Z_2 w + Z_1 x)} \right|^2 \cdot \frac{Z_1}{Z_2} \\ R(1 \longrightarrow 2) &= \left| \frac{(Z_2 u + v) - (Z_1 Z_2 w + Z_1 x)}{(Z_2 u + v) + (Z_1 Z_2 w + Z_1 x)} \right|^2. \end{aligned} \quad (4a)$$

Mit der Umkehrmatrix, d.h. der Matrix für die umgekehrte Lichtausbreitungsrichtung $||M^u||$

$$||M^u|| = \begin{vmatrix} x & v \\ w & u \end{vmatrix} \quad (4b)$$

ist

$$R(2 \longrightarrow 1) = \left| \frac{(Z_1 x + v) - (Z_1 Z_2 w + Z_2 u)}{(Z_1 x + v) + (Z_1 Z_2 w + Z_2 u)} \right|^2$$

Da beide Medien „1“ und „2“ als nicht bzw. schwach absorbierend vorausgesetzt sind, sind die beiden sogen. gemischten Poynting-Vektoren $G(1 \longrightarrow 2)$ und $G(2 \longrightarrow 1)$ beide gleich Null und für die relative absorbierte Leistung A , die im zeitlichen Mittel in der Profilplatte freigesetzt wird, besteht die Gleichung:

$$\begin{aligned} &\text{für nicht oder schwach} \\ &\text{absorbierende Begrenzungsmedien: } R + T + A = 1. \end{aligned} \quad (4c)$$

Für unsymmetrische R bei Umkehrung der Durchstrahlungsrichtung ergibt sich damit auch Unsymmetrie in Bezug auf Leistungsfreisetzung in der Profilplatte.

Weiterhin gilt die Bedingung, daß die Determinante der resultierenden Matrix stets den reellen Wert Eins besitzen muß (vgl. dazu die Ausführungen in [1] bzw. [2]. Es muß also gelten:

$$\begin{aligned} u \cdot x - w \cdot v &= 1 \text{ bzw. } \operatorname{Re}[ux - wv] = 1 \\ \operatorname{Im}[ux - wv] &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Mit der Abkürzung

$$A = |(Z_2 u + v) + (Z_1 Z_2 w + Z_1 x)| \quad (6)$$

gilt

$$A = 2 Z_2 / \sqrt{T(1 \longleftrightarrow 2) \cdot n_1/n_2} \quad (7)$$

$$C = \sqrt{R(1 \longrightarrow 2)} = \frac{1}{A} \left| (Z_2 u + v) - (Z_1 Z_2 w + Z_1 x) \right| \quad (8)$$

$$E = \sqrt{R(2 \longrightarrow 1)} = \frac{1}{A} \left| (Z_1 x + v) - (Z_1 Z_2 w + Z_2 u) \right| \quad (9)$$

Für die Summenvektoren $(Z_2 u + v)$, $(Z_1 Z_2 w + Z_2 x)$, $(Z_1 x + v)$ und $(Z_1 Z_2 w + Z_2 u)$ bestehen also bezüglich deren Summen bzw. Differenzen neben (6) die folgenden Relationen zu den entsprechenden Beträgen:

$$\begin{aligned} C \cdot A &= |(Z_2 u + v) - (Z_1 Z_2 w + Z_1 x)| \\ E \cdot A &= |(Z_1 x + v) - (Z_1 Z_2 w + Z_2 u)| \end{aligned} \quad (10)$$

Die Beträge A , $C \cdot A$ und $E \cdot A$ sind andererseits unmittelbar durch die Meßwerte gegeben [siehe Gl. (7) bis (9)].

Diese Situation erlaubt eine graphische Darstellung beginnend zunächst mit den Werten A und $C \cdot A$. Dabei wird willkürlich, aber zweckmäßig, der Vektor $(Z_2 u + v)$ in die x -Richtung des x - y -Achsenkreuzes gelegt. Der Einzelvektor v , das wird später die Analyse erleichtern, beginnt dabei im Ursprung, ist zunächst natürlich noch unbekannt.

Durch die Wahl eines zweiten Herkunftsmediums Z_1 , und zwar Z_{1b} anstelle von Z_{1a} , ebenfalls mit reellem Brechungsindex, ergeben sich andere Meßwerte. Dies bedeutet

jedoch andererseits in Bezug auf die RM, bzw. die zur Diskussion stehenden Vektoren nur eine Betragsänderung bzw. Längenänderung des Summenvektors ($Z_1Z_2w + Z_1x$) um den Faktor Z_{1b}/Z_{1a} , so daß die Vektorendpunkte zu den Punkten 1,2,3 und 4 auf einer Linie liegen müssen. Der Mittelpunkt „7“ liegt dabei als Endpunkt des Summenvektors ($v + Z_2u$) auf der x-Achse und bleibt unverändert. Die Abb.2 erläutert dazu graphisch die Vektorlage und die Punktkennzeichnung.

Aus einfachen trigonometrischen Beziehungen ergibt sich damit der Betrag des Vektors $(\mathbf{y} + \mathbf{Z}_2\mathbf{u})$ zu:

$$|(\mathbf{v} + \mathbf{Z}_2 \mathbf{u})| = \overline{07} = \left[\frac{\overline{03}^2 + \overline{01}^2}{2} - \frac{\overline{04}^2 + \overline{02}^2 - \overline{03}^2 - \overline{01}^2}{2 \cdot (\mathbf{Z}_{1b}/\mathbf{Z}_{1a}) - 2} \right]^{1/2} \quad (11)$$

Hier und im folgenden werden die Vektorbeträge alternativ auch durch den entsprechenden Punktabstand in Abb. 2 und Abb. 3 gekennzeichnet in der Form $\overline{07}$, um beim obigen Beispiel zu bleiben.

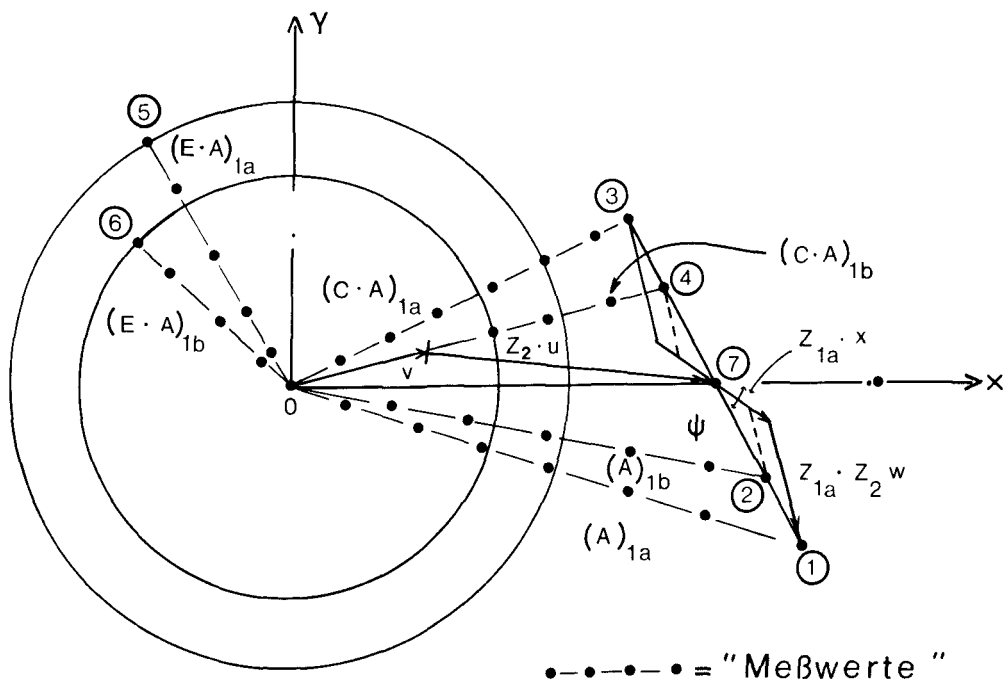


Abb. 2:

Geometrische Darstellung der Beziehungen zwischen den komplexen Matrizenkoeffizienten einerseits und den „Meßwerten“ andererseits. Zur Erläuterung der Bezeichnungen siehe Text.

Der Winkel ψ zwischen den Vektoren/Strecken $\overline{07}$ und $\overline{71}$ hat den Wert:

$$\psi = \arccos \left(\frac{\overline{07}^2 + \overline{71}^2 - \overline{01}^2}{2 \cdot \overline{07} \cdot \overline{01}} \right) - 180^\circ \quad (12)$$

Damit liegen die Größen und die relative Lage der Summenvektoren $(v + Z_2u)$ und $Z_1(x + Z_2w)$ fest (siehe Abb. 2) und zwar eindeutig und unmittelbar durch die Meßwerte.

Die weiteren Überlegungen sollen nun zur Bestimmung des Vektors v führen, der als einziger der Matrizenkoeffizienten nicht mit den Wellenwiderständen verknüpft in das Meßergebnis eingeht. Nach der Ermittlung dieses ersten Matrizenkoeffizienten folgen die übrigen durch schrittweises Einsetzen in die bereits bestehenden Gleichungen.

Betrachtet man die beiden weiteren „Meßwerte“ $E \cdot A$ für jeweils die beiden unterschiedlichen Herkunftsmedien „1a“ und „1b“,

$$\begin{aligned} (EA)_{Z1a} &= |(v - Z_2u) + Z_{1a}(x - Z_2w)| = \overline{05} \\ (EA)_{Z1b} &= |(v - Z_2u) + Z_{1b}(x - Z_2w)| = \overline{06} \end{aligned} \quad (13)$$

so sind damit zwei Punkte je auf einem konzentrischen Kreis um den Koordinatenursprungspunkt gegeben. Die relative Lage der Punkte 5 und 6, d.h. der Punktabstand, und die Winkellage bzw. der Betrag $\overline{56}$ und Orientierung des Differenzvektors $(Z_{1a} - Z_{1b}) \cdot (x - Z_2w)$ sind noch unbekannt. Jedoch sind die obere und die untere Schranke dieses Vektors gegeben, denn es gilt:

$$|\overline{05} - \overline{06}| \leq \overline{56} \leq \sqrt{|\overline{05}^2 - \overline{06}^2|}. \quad (14)$$

Die obere Schranke ist dabei offensichtlich die halbe Sekante des größeren Kreises, die den kleineren Kreis berührt (siehe Abb. 2).

Der Punktabstand $\overline{56}$ entspricht andererseits dem Betrag des Differenzvektors

$$|(Z_{1a} - Z_{1b}) \cdot (x - Z_2w)| = \overline{56}, \quad (15)$$

so daß der Betrag des Differenzvektors $Z_{1a} \cdot (x - Z_2w)$ gegeben ist zu:

$$|Z_{1a} \cdot (x - Z_2w)| = \overline{58} = \overline{56} \frac{Z_{1a}}{(Z_{1a} - Z_{1b})} \quad (16)$$

entsprechend dem Punktabstand $\overline{58}$. Ausgehend vom Punkt 5 ergibt sich damit durch Festlegung von $\overline{56}$ eine zweifache mögliche Punktlage von Punkt 8 („8“ und „8““ in Abb. 3).

Zum Punkt „8“, bzw. „8““ zeigt andererseits der Vektor $(v - Z_2u)$, denn es ist

$$|(v - Z_2 \cdot u) + Z_{1a}(x - Z_2w)| = (E \cdot A)_{Z1a}. \quad (17)$$

Mit dem Punkt „8“ liegt dann auch der Vektor v fest, denn v führt zu der Mitte der Verbindungslinie $\overline{78}$. Hat also der Punkt „8“ die Koordinaten P8x und P8y, so hat v die Komponenten:

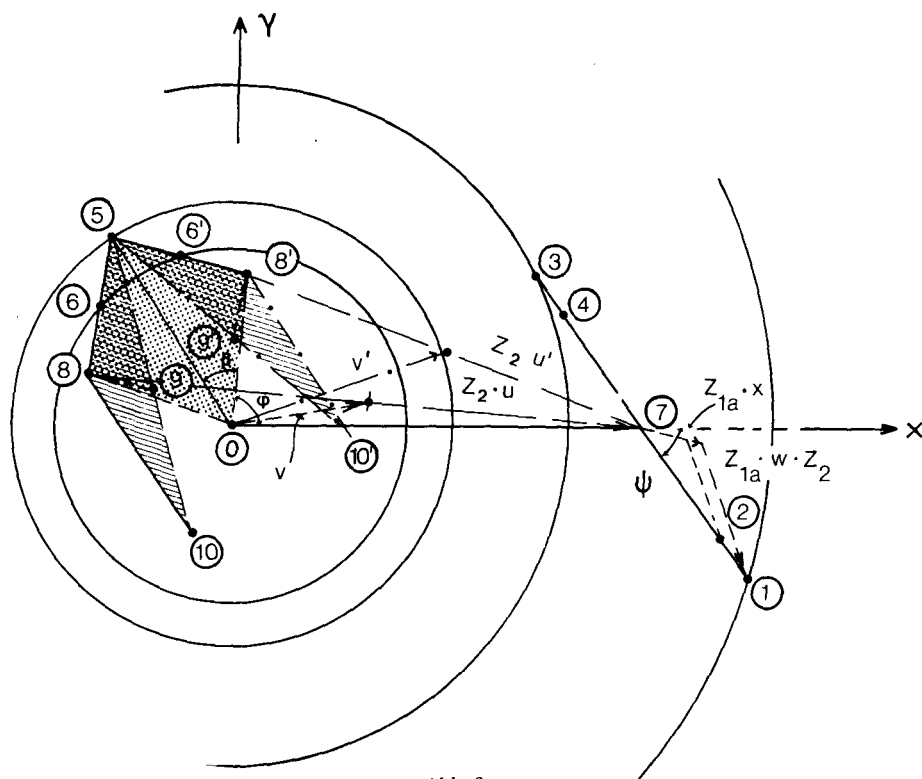


Abb. 3:

Skizze zur Erläuterung der Beziehungen zwischen den komplexen Größen, insbesondere bei der Variation des Winkels φ . Die Zusammenhänge sind im Text erklärt.

$$\begin{aligned} v_x &= (\overline{07} + P8x)/2 \\ v_y &= P8y/2. \end{aligned} \quad (18)$$

Mit v ist andererseits unmittelbar der Vektor u gegeben:

$$u_x = (\overline{07} - v_x)/Z_2 \text{ und } u_y = -v_y. \quad (19)$$

Die Berechnung der Vektoren w und x ergibt sich aus der Konstruktion eines Punktes „10“, bzw. „10'“, mit der Vektorbeziehung:

$$\overrightarrow{\text{P10}} = (\mathbf{v} - Z_2 \mathbf{u}) + Z_{12}(\mathbf{x} + Z_2 \mathbf{w}). \quad (20)$$

Es ist demnach $\overline{810} = \overline{71}$, und diese Strecken liegen parallel, und zwar unabhängig von der Position des Punktes 8 bzw. von der Wahl bzw. Vorgabe des Punktes 5 durch die Wahl des Winkels Phi (siehe Abb. 3). Der Winkel Beta ist dabei einerseits durch die „Meßwerte“ $\overline{05}$ und $\overline{06}$ und andererseits durch die Wahl der Strecke $\overline{56}$, bzw. die daraus gemäß Gl. (16) folgende Strecke $\overline{58}$ festgelegt (siehe dazu die Programmerläuterungen im Anhang B).

Zieht man von dem eben definierten Vektor zu Punkt 10 den doppelten Vektor $Z_{1a}Z_2w$ ab, so gelangt man wieder zu Punkt 5, denn es muß stets gelten (siehe oben):

$$(v - Z_2u) + Z_{1a}(x - Z_2w) = \overline{05}. \quad (21)$$

Der Vektor $Z_{1a} \cdot x$, der dann zu der gesuchten Größe x führt, ist demnach der Vektor von Punkt 8 zu Punkt 9, wobei letzterer die Strecke $\overline{510}$ halbiert. Andererseits geht der Vektor $Z_{1a}Z_2w$ selbst von Punkt 9 nach 10 und ist damit ebenfalls festgelegt. – Entsprechendes gilt bei der „Spiegellage“ bezüglich der analogen Punkte $8'$, $9'$ und $10'$.

Die gesuchten Vektoren u , v , w und x , d.h. die Matrizenkoeffizienten liegen also quantitativ vor, wenn bei vorgegebener Wahl von Punkt 5, bzw. des Winkels $\Phi + \beta$, die Strecke $\overline{56}$ in den gegebenen Grenzen richtig gewählt wird.

Die Richtigkeit der Wahl ist anhand der Bedingung Gl. (5) zu prüfen, die aussagt, daß die Determinante der RM gleich Eins sein muß. Die Eindeutigkeitsfrage, die sich natürlich hier sofort stellt, wird weiter unten diskutiert.

III. Absoluter polarer Winkel

Da der Summenvektor $(v + Z_2u)$ willkürlich in die x -Richtung des verwendeten Koordinatenkreuzes gelegt wurde, die korrespondierende komplexe Größe also rein reell angesetzt wurde, ist zwar die relative Lage der Vektoren u , v , w und x korrekt, aber die absolute Lage des ganzen Systems noch unbestimmt. Demnach ist also noch eine gemeinsame Drehung als „Endkorrektur“ notwendig.

Bezüglich der Determinante der RM bedeutet dies, daß zunächst nicht die Bedingung $(uv - wx) = 1$, sondern nur die Notwendigkeit ausgenutzt werden darf, daß der Betrag der im allgemeinen als komplexe Größe auftretenden Determinante gleich Eins sein muß:

$$|(uv - wx)| = 1. \quad (22)$$

Der Imaginärteil der Determinante kann dann immer durch eine gemeinsame Drehung der vier Vektoren um den Winkel ϑ zu Null gemacht werden. Dieser Drehwinkel ergibt sich aus der polaren Darstellung der Determinante in eindeutiger Weise zu

$$\vartheta = \frac{\Theta}{2}, \quad (23)$$

wobei Θ durch die Beziehung gegeben ist:

$$\text{Determinante } |M| = \text{ABS}(|M|) \cdot \exp(i \cdot \Theta). \quad (24)$$

Es entsteht an dieser Stelle die Frage, ob der Betrag der Determinante und/oder der Winkel der erforderlichen „Rückdrehung“ von der anfänglichen Wahl des Winkels Φ bzw. $\Phi + \beta$ abhängen. Dazu ist folgendes auszuführen:

Die Vektorberechnung beginnt, wie oben ausgeführt, mit der „Suche“ nach dem korrekten Wert der Strecke $\overline{56}$ bzw. $\overline{58}$ in gesteuerter Schrittweite (siehe weiter unten

bzw. Anhang B) in den Grenzen des Minimal- und Maximalwertes (siehe oben). Eine nähere, zunächst rein numerisch durchgeführte Untersuchung hat dabei ergeben:

1. Der Wert der Strecke $\overline{58}$, der zu dem Betrag der Determinante gleich Eins und damit nach der „Rückdrehung“ zu der Erfüllung der Bedingung $|M|=1$ führt, hängt in zunächst überraschender Weise nicht (!) von dem Wert des Winkels Φ bzw. $\Phi + \beta$ ab. Es genügt demzufolge, einen beliebigen Wert Φ vorzugeben.

Die Vierpoltheoretische Beweisführung für diesen Tatbestand ist jedoch durch Gl. (4a) gegeben: Die Symmetrie des Transmissionsgrades ist umkehrbar eindeutig mit der Bedingung $|M|=1$ verbunden. Die „Übertragungssymmetrie“ $T(1 \longleftrightarrow 2)$ hängt aber andererseits nur von der Vektorsumme zu Punkt „1“ ab, diese aber ist unabhängig vom Winkel Φ .

Anschaulich gesprochen ist also eine Drehung der durch die Punkte 5, 8 und 8' gegebenen „Figur“ (siehe Abb. 3) um den Koordinatenursprungspunkt unschädlich in Bezug auf die Erfüllung der Bedingung $|M|=1$.

2. Als Folge der möglichen „Spiegellage“ der Konfiguration der Vektoren $Z_{1a}x$ und $Z_{1a}Z_2w$ in Bezug auf ihre eindeutig festliegende und bereits bestimmte Vektorsumme muß die Rechnung zweifach, d. h. für eine Punktlage in Position 8 und 8' durchgeführt werden. Es zeigt sich jedoch, zumindest in den bisherigen Rechnungen mit realen und auch theoretisch „vorausgerechneten“ Meßwerten, daß jeweils zwei Fälle zu einem Determinantenbetrag vom Werte Eins führen. Dazu ist in Abb. 4 zur Verdeutlichung des Werteverlaufs jeweils der Betrag der Determinante als Funktion des Wertes der Strecke $\overline{58}$ für die beiden Fälle aufgetragen.

3. Gemäß Abb. 4 ergibt sich im vorliegenden Fall für die Lage „A2“ ein doppelter Durchgang durch den Wert $ABS(|M|)=1$. Dies korrespondiert mit dem „Startwert“ >1 beim Minimalwert der Größe $\overline{56}$. In anderen Fällen kann der Startwert auch unter Eins liegen. Dann tritt in jedem Ast, d. h. bei „A1“ und „A2“, je ein Durchgang durch den Wert Eins auf.

Auf jeden Fall ergeben sich damit jeweils zwei Werte für sämtliche Vektorbeträge und zwei Rückdrehwinkel bzw. zwei „richtige“ Koeffizientensätze für die RM.

Insofern bleibt das Resultat der Bemühung um die Bestimmung der RM unter Verwendung zweier Herkunftsmedien, aber nur eines Abschlußmediums zweideutig. Die Lösung des Problems erfordert demnach auch die Meßwerte unter Verwendung eines zweiten Abschlußmediums für die Profilplatte, wie es im folgenden Abschnitt aufgezeigt und diskutiert wird.

Die Abb. 4b zeigt einen vergrößerten Ausschnitt aus der Darstellung Abb. 4a, um darauf hinzuweisen, daß die Durchgänge durch den Wert Eins relativ gesehen sehr steil sind, die Empfindlichkeit bezüglich der Bestimmung des gesuchten Parameters also sehr groß ist. Zur weiteren Genauigkeitsdiskussion in Bezug auf die Ermittlung der RM wird auf den entsprechenden späteren Abschnitt verwiesen.

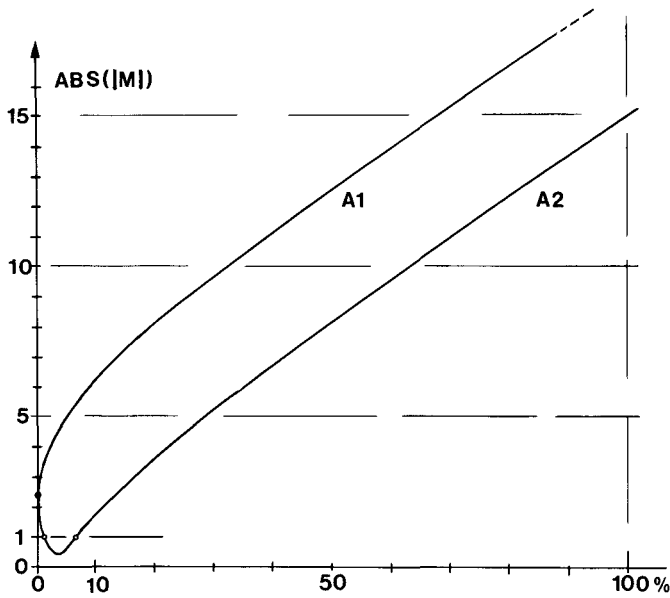


Abb. 4a:

Abhängigkeit des Betrages der Determinante der resultierenden Transformationsmatrix von der Größe des Betrages $\overline{56}$ für die relative Lage A1 und die „Spiegellage“ A2.

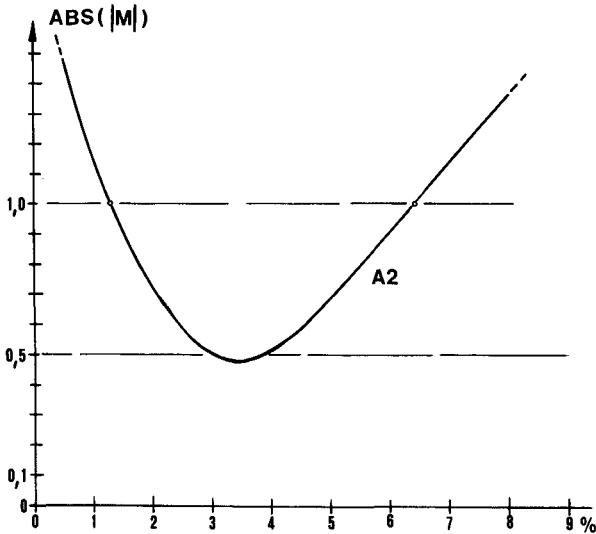


Abb. 4b:

Vergrößerter Ausschnitt aus Abb. 4a für den Fall der Lage A2 zur Darstellung des doppelten Durchganges durch den Wert $ABS(|M|)=1$.

IV. Eindeutigkeit

Die bisherigen Ausführungen haben gezeigt, daß unter Verwendung zweier Herkunftsmedien bei jedoch nur einem Abschlußmedium zwar eine Bestimmung der resultierenden Matrix (RM) aus den beiden Meßwerten des (jeweils symmetrischen) Transmissionsvermögens und den vier Werten des Reflexionsvermögens möglich ist, daß jedoch zwei Koeffizientensätze auftreten, die beiden den Meßwerten entsprechen und die generelle Bedingung erfüllen, daß die Determinante der RM gleich Eins sein muß. Diese Situation kann insofern nicht überraschen, weil nämlich die beiden Reflexionswerte $R(1a \longrightarrow 2)$ und $R(1b \longrightarrow 2)$ keine getrennten, d. h. unabhängigen Informationen über die RM enthalten. Beide hängen vielmehr in gleicher Weise nur von dem komplexen Eingangswiderstand des „Systems“ $\tilde{W}(\longrightarrow 2)$ ab, der seinerseits durch die Koeffizienten der RM und das Abschlußmedium bestimmt ist in der Form:

$$\tilde{W}(\longrightarrow 2) = \frac{\tilde{Z}_2 \cdot u + v}{\tilde{Z}_2 \cdot w + x}. \quad (25)$$

Dies wird einsichtig, wenn man das Reflexionsvermögen nicht nach der Art von Gl. (4) direkt mit den Matrizenkoeffizienten, sondern in der bekannten Weise mit Hilfe des Eingangswiderstandes ausdrückt:

$$R(1 \longrightarrow 2) = |\tilde{r}(1 \longrightarrow 2)|^2 = \left| \frac{\tilde{W}(1 \longrightarrow 2) - \tilde{Z}_1}{\tilde{W}(1 \longrightarrow 2) + \tilde{Z}_1} \right|^2 \quad (26)$$

mit $\tilde{r}(1 \longrightarrow 2) =$ „Reflexionsfaktor“
(als Amplitudenverhältnis).

Der durch die RM zum Ausdruck kommende Vierpol transformiert eben nur den komplexen Wellenwiderstand des Abschlußmediums auf die Vorderseite. Mit einem (!) Abschlußmedium erhält man deswegen auch nur eine einzige (unabhängige) Bestimmungsgleichung in Bezug auf die Matrizenkoeffizienten. Die beiden unterschiedlichen Meßwerte bei der Verwendung zweier Herkunftsmedien gehen dabei in trivialer Weise aus Gl. (25) durch Austausch ausschließlich dieser Wellenwiderstände hervor.

Es erscheint an dieser Stelle des Hinweises wert, daß ebenso wie $\tilde{W}(\longrightarrow 2)$, der Reflexionsfaktor und das Reflexionsvermögen auch der Transmissionsfaktor $\tilde{t}(1 \longrightarrow 2)$ und damit das Transmissionsvermögen $T(1 \longleftrightarrow 2)$

$$T(1 \longleftrightarrow 2) = |\tilde{t}(1 \longrightarrow 2)|^2 \cdot \text{Re} \{ \tilde{Z}_1 / \tilde{Z}_2 \} \quad (27)$$

$$\text{mit } \tilde{t}(1 \longrightarrow 2) = \frac{2 \cdot \tilde{Z}_1 \cdot \tilde{Z}_2 / (\tilde{Z}_2 \cdot w + x)}{\tilde{W}(1 \longrightarrow 2) + \tilde{Z}_1}$$

nur von den Summenkoeffizienten/Summenvektoren $(v + Z_2 \cdot u)$ und $(x + Z_2 \cdot w)$ abhängen, und nicht von den Einzelkoeffizienten/Einzelvektoren, d. h. von deren einzelndem Betrag bzw. polarem Winkel. Das Gleiche gilt dann auch für das Absorptionsvermögen $A(1 \longrightarrow 2)$ [vgl. dazu die früheren Gleichungen (4a) und (4b)].

Die oben genannten sechs Meßwerte liefern also tatsächlich nur vier voneinander unabhängige Bedingungsgleichungen.

Es ist deswegen notwendig, einen Satz analoger Messungen auch mit einem zweiten Medium als Abschlußmedium „2“ durchzuführen, d. h. ein „2a“ und „2b“ zu verwenden. Damit würde sich nach der oben erläuterten Analyse ein zweites Mal ein Wertepaar für die Größe $\overline{08}$ ergeben. Diese zweimal zwei Werte $\overline{08}$ müssen dann durch eine jeweils geeignete Wahl des Winkels Φ so verbunden werden, daß sich eine gemeinsame und damit eindeutige RM ergibt.

Die Eindeutigkeit läßt sich jedoch diesbezüglich anders gewinnen, und zwar unter Ausnutzung des Umstandes, daß in beiden Vektordarstellungen in Bezug auf die „Meßwerte“ (vgl. Abb. 3) der Vektor v (als Einziger!) isoliert auftritt und der gleiche ist. Dies kann als Bedingung ausgenutzt werden.

Hier geht jetzt auch der Winkel Φ in die Analyse ein, der bisher keinen Einfluß auf das Zwischenresultat hatte. Variiert Φ von Null bis 360 Grad, so variiert der Vektor v derart, daß sein Endpunkt auf einem Kreis rotiert, dessen Mittelpunkt auf der x-Achse liegt und die folgenden Koordinaten besitzt:

$$M_y = 0; \quad M_x = \frac{1}{2} \overline{07}. \quad (28)$$

Der entsprechende Kreisradius r beträgt:

$$r = \frac{1}{2} \overline{08}. \quad (29)$$

Dabei ist der Vektor v vor (!) seiner „Rückdrehung“ und das Achsenkreuz für den Fall des Abschlußmediums „2a“ ins Auge gefaßt. Die Gl. (28) und (29) gehen dann aus einer einfachen geometrischen Betrachtung anhand von Abb. 3 hervor.

Der gesuchte, also gleiche Wert des nicht rückgedrehten Vektors v in den beiden Fällen der Abschlußmedien „2a“ und „2b“ läßt sich nach Betrag und polarem Winkel eindeutig aus der Bedingung ableiten, daß der Vektor v einerseits auf dem Ortskreis (hier im Beispiel bezogen auf das Abschlußmedium „2a“) liegen muß, andererseits aber mit den gleichen Vektoren v und u in der Form $(v + Z_{2b} \cdot u)$ der Punkt „7“ bezogen auf das Abschlußmedium 2b erreicht werden muß. Dieser Punkt „7(2b)“ liegt naturgemäß nicht mehr auf der x-Achse des für das System des „Falles 2a“ gewählten Achsenkreuzes.

Da beide Wellenwiderstände Z_{2a} und Z_{2b} reell vorausgesetzt sind, ergibt sich aus einer zweimaligen Anwendung des Kosinussatzes in Verbindung mit der Kreisgleichung der Realteil bzw. die x-Koordinate des Koeffizienten bzw. des Vektors v zu:

$$v_x = \left\{ \left(\frac{Z_{2b}}{Z_{2a}} - 1 \right)^2 \left[\left(\frac{\overline{07}_{2a}}{2} \right)^2 - \left(\frac{\overline{08}_{2a}}{2} \right)^2 \right] + \overline{07}_{2b} - \left(\frac{Z_{2b}}{Z_{2a}} \overline{07}_{2a} \right)^2 \right\} * \\ * \left[\overline{07}_{2a} \left(1 - \frac{Z_{2b}^2}{Z_{2a}^2} \right) \right]^{-1} \quad (30)$$

und im Sinne der Kreisgleichung die andere Komponente zu:

$$v_y = \left[\left(\frac{\overline{08}_{2a}}{2} \right)^2 - \left(v_x - \frac{\overline{07}_{2a}}{2} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (31)$$

Interessant ist, daß damit zur Bestimmung von v neben dem eindeutigen Wert $\overline{07}(2a)$ und dem durch die Bedingung $|M|=1$ aus der entsprechenden „Suche“ gewonnenen Wert $\overline{08}(2a)$ nur der eindeutige Wert $\overline{07}(2b)$ benötigt wird.

Abb.5 zeigt die geometrische Situation bezüglich des Vektors \mathbf{v} bei der Drehung und bezüglich der Lage der Punkte $\overline{07}(2a)$ und $\overline{07}(2b)$ als gesonderte Skizze zur Erläuterung:

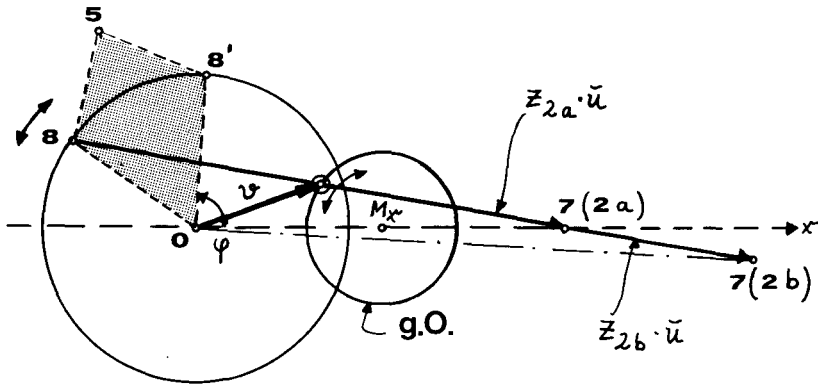


Abb. 5:

Skizze zur Erläuterung der Variation des nicht rückgedrehten Vektors v bei Variation des Winkels φ .
Der geometrische Ort des Endpunktes von v ist der Kreis um den Mittelpunkt ($M_x, M_y=0$).

Der endgültige Wert des Koeffizienten/Vektors v ergibt sich dann nach der „Rückdrehung“ um den Winkel ϑ , die die Determinante reell macht (siehe oben). Dazu wird mit dem gewonnenen Wert von v , es wird dabei jedoch nur der Betrag von v benötigt, der dadurch festgelegte Winkel Φ rückwärts bestimmt gemäß:

$$(\varphi)_{08} = \arccos\left(\frac{|\mathbf{v}|^2}{07_{2a} * 08_{2a}}\right) - 2\beta, \quad (32a)$$

wobei der Winkel Beta bereits durch die Festlegung von $\overline{08}$ bestimmt ist (vgl. die Ausführungen zum Rechenprogramm im Anhang).

Bezogen auf den Punkt 8' bzw. die Strecke $\overline{08'}$ gilt entsprechend:

$$(\varphi)_{\overline{08}'} = \text{acos} \left(\frac{|v|^2}{\overline{07}_{2a} * \overline{08}'_{2a}} \right). \quad (32b)$$

Damit wird die nicht-rückgedrehte RM $||\mathbf{M}||_{\text{nr}}$ berechnet, aus der sich im Sinne der oben besprochenen Rückdrehung die endgültige RM mit $|\mathbf{M}|=1$ ergibt zu:

$$||\mathbf{M}|| = ||\mathbf{M}||_{nr} * \left[\frac{||\mathbf{M}||_{nr}}{\text{ABS}(|\mathbf{M}|_{nr})} \right]^{-1/2} \quad (33)$$

Hier ist jedoch nach der „Suchprozedur“ bereits $\text{ABS}(|M|_{\text{nr}})=1$ gegeben.

Bei der Drehung des Winkels Phi wandert der Punkt „7(2b)“ ebenfalls auf einem Kreis und zwar mit dem Mittelpunkt $M'x = \overline{07}(2a) * [1 - Z(2b)/Z(2a)]/2$, $M'y = 0$ und mit dem Radius $r' = \overline{08}(2a) * [1 - Z(2b)/Z(2a)]/2$. Der erste Schnittpunkt dieses Kreises mit dem Kreis um den Ursprungspunkt mit dem Radius $\overline{07}(2b)$ liefert ebenso die Festlegung des Winkels Phi. Der zweite Schnittpunkt entspricht dabei nur einer Vorzeichenänderung des Winkels.

An dieser Schnittfigur lassen sich auch die relativen Genauigkeitseinflüsse ablesen: Je größer der Schnittwinkel der beiden Kreise ist, desto genauer wird der Winkel Φ bzw. der Vektor v bei einer gegebenen Meßunsicherheit bestimmt.

Mathematisch gesehen wäre auch ein Fall ohne Schnittpunkt, d.h. ohne Lösung möglich, dem entspricht jedoch keine physikalische Realität bei gegebenen experimentellen Meßwerten.

Da sich aus der Bedingung $|M|=1$ zwei (!) Werte $\overline{08}(2a)$ ergeben haben, ist der „wahre“ Wert von v und damit auch die „wahre“ RM durch Rückgriff auf die Determinantenbedingung der RM im Fall des Abschlußmediums 2a zu selektieren. Dazu ist mit den beiden Werten von v bzw. mit beiden RM aus Fall 2a ein rechnerischer Vergleich mit den Parametern $\overline{01}(2b)$ und $\overline{03}(2b)$, bzw. $\overline{02}(2b)$ und $\overline{04}(2b)$, oder direkt mit den Meßwerten des „Falles 2b“ durchzuführen. Erwartungsgemäß werden mit der einen RM diese Werte reproduziert, mit der anderen jedoch nicht. Auf diese Weise ist die richtige RM festgestellt und ein eindeutiges Resultat gegeben.

Die Überprüfung der Richtigkeit des Wertes $\overline{07}(2b)$ ist insofern natürlich überflüssig, als dieser Wert ja in die Rechnung bereits als bestimmende Größe eingegangen ist.

Die Eindeutigkeit ergibt sich damit aus der Nutzung der Gleichungen (6) bis (10) unter rückwärtsgerichteter Anwendung in Bezug auf das Medium „2b“ in Verbindung mit den Medien „1a“ und „1b“ und unter Einsatz der jeweiligen Matrizenkoeffizienten.

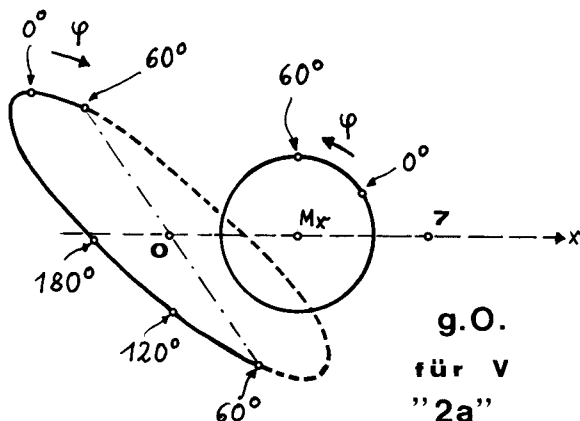


Abb. 6:

Geometrische Darstellung der Transformation der Ortskurve von v als Kreis (vgl. Abb. 5) in eine halbe Ellipse bei der „Rückdrehung“ – siehe die Erläuterungen im Text.

Als Ergänzung zu den obigen Ausführungen sind noch einige Bemerkungen anzufügen:

1. Zur Vervollständigung der Darstellung der Vektorzusammenhänge zeigt Abb. 6 die Variation des bereits zurückgedrehten Vektors v , wenn der Winkel Φ variiert. Man erkennt die korrespondierende Transformation des bisherigen Vollkreises als Ortskurve in eine halbe Ellipse, in deren Zentrum nunmehr der Koordinatenursprungspunkt liegt. – Auf diesen interessanten Transformationsaspekt soll hier jedoch nicht näher eingegangen werden.

2. Es ist auf den Umstand hinzuweisen, daß die RM in Wahrheit nicht acht, sondern als RM eines übertragungssymmetrischen Vierpols nur sechs voneinander unabhängige komplexe Koeffizienten besitzt (vgl. dazu Anhang A), demnach also auch nur sechs voneinander unabhängige Bestimmungsgleichungen existieren können. Die entsprechende Reduktion der vier Matrizenkoeffizienten führt jedoch zu einer derart komplizierten Darstellung für den Zusammenhang mit den Meßgrößen, daß eine Analyse auf der Basis von Vektorgleichungen und damit auch eine graphisch-anschauliche Darstellung der Zusammenhänge, wie hier gegeben, nicht mehr möglich ist. Nach der in obigem Sinne durchgeführten Bestimmung der RM kann die Reduktion jedoch rein rechnerisch leicht durchgeführt werden, da die Vierpoltheorie die entsprechenden Gleichungen zur Verfügung stellt (siehe [3] bzw. Anhang A).

3. Der Winkel Φ tritt gemäß Gl. (32) mit beiden Vorzeichen auf. Dies bedeutet jedoch insofern keine wahre Mehrdeutigkeit, als damit nur die Vorzeichen aller Imaginärteile der Koeffizienten, bzw. die Vorzeichen aller y -Komponenten der Vektoren, gewechselt werden. Dies entspricht einer generellen Spiegelung an der reellen bzw. x -Achse. Analoge Vorzeichenwechsel treten bekanntlich z.B. auch bei den Phasenwinkeln der elektrischen Größen auf, wenn in der Zeitfunktion $-i\omega t$ anstelle von $+i\omega t$ verwendet wird.

V. Lösungsbeispiel und Diskussion

Die Güte des Verfahrens der Auffindung der resultierenden Matrix einer optisch inhomogenen Platte soll mit einem Beispiel demonstriert werden. Dabei ist dann auch Gelegenheit, die Genauigkeitsfragen zu diskutieren.

Als Beispiel wird der auch praktisch relevante Fall einer inhomogenen dotierten Halbleiterschicht von wenigen μm Dicke gewählt. Das Konzentrationsprofil der freien Ladungsträger (im vorliegenden Fall sind es durch Bor-Ionenimplantation in Silizium erzeugte „Löcher“ als freie Ladungsträger) sei von der Form einer unter der Oberfläche liegenden Gauß-Funktion. Die Parameter dazu und das daraus folgende Profil im Brechungsindex und im Absorptionsindex sind in Abb. 1 angegeben. Mit dem Profil des komplexen Brechungsindex für $10\ \mu\text{m}$ Vakuumwellenlänge wurde dann die resultierende Matrix mit Hilfe der Vierpoltheorie durch Approximation mit hinreichend fein abgestufter Schrittweise berechnet. Damit lassen sich dann nach den oben angegebenen Beziehungen die theoretischen „Meßwerte“ für das Reflexions- und das Trans-

missionsvermögen bei beliebigen Herkunfts- und/oder Abschlußmedien, ebenso also auch bei beliebiger Durchstrahlungsrichtung der Profilplatte, berechnen.

In früheren Untersuchungen [1,2,4] an optisch inhomogenen dünnen Schichten ist die Übereinstimmung zwischen den nach der Vierpoltheorie berechneten und experimentell bestimmten Werten von Reflexion und Transmission nachgewiesen worden. Die verbliebenen geringen Abweichungen sind insofern leicht zu verstehen, als die verwendete Modellfunktion des Konzentrationsprofils nur eine Näherung der wahren Verhältnisse darstellt und auch die Konzentrationsabhängigkeit der Parameter, z.B. der Stoßzeit und der effektiven Masse unberücksichtigt geblieben ist.

Insofern ist die Prüfung einer prinzipiellen Methode, hier der rückwärtigen Bestimmung der resultierenden Matrix, anhand von empirischem (!) Material eben wegen der Existenz nicht exakt erfaßbarer systematischer Fehler problematisch.

Die Prüfung der Methode kann im vorliegenden Fall jedoch exakt anhand berechneter „Meßwerte“ erfolgen, die mit einer vorgegebenen resultierenden Matrix in „Vorwärtsrechnung“ bestimmt wurden. Wenn die „Rückwärtsrechnung“ richtig ist, muß sich genau die ursprüngliche resultierende Matrix wieder als Resultat ergeben. Auftretende Abweichungen sind dabei nur noch durch die numerische Diskretisierung bzw. Rundung bedingt und erlauben eine Diskussion der Genauigkeit des Verfahrens an sich.

Die vorgeschriebene Wahl je zweier unterschiedlicher Herkunfts- und Abschlußmedien, also der Medien der Indizierung 1a, 1b, 2a und 2b, bereitet in diesem Rechengang natürlich keinerlei Schwierigkeiten, so schwierig es auch experimentell sein mag, passende Medien mit den notwendigen optischen Eigenschaften zu finden bzw. als Begrenzungsmedien einzusetzen.

Im vorliegenden Fall wurden die Medien 1a und 1b als einerseits Vakuum mit $n(1a) = 1$ (vergleichsweise realisiert auch durch Luft) und andererseits mit $n(1b) = 1.5$ (vergleichsweise realisierbar durch eine Flüssigkeit) angenommen. Als Medium 2a wurde zunächst Silizium selbst mit $n(2a) = 3.50$ gewählt, entsprechend dem Umstand, daß das Dotierungsprofil in einer massiven Siliziumprobe durch Ionenimplantation entstanden ist. Als Medium „2b“ wurde Germanium ins Auge gefaßt mit $n(2b) = 4.0$, weil damit ein typischer Variationsbereich im Brechungsindex der Halbleitermaterialien, die als Trägersubstanzen für z.B. dünne Siliziumschichten in Frage kommen, ins Spiel gebracht wird.

Jedenfalls ist mit der geschilderten Wahl des Beispielles sichergestellt, daß sich die Verhältnisse in realistischen optischen Grenzen bewegen und ein direkter Bezug zur technologischen Praxis gegeben ist.

Die Tabelle 1 stellt die Daten des Lösungsbeispiels zusammen. Mit der aus der Lösungsprozedur gewonnenen resultierenden Matrix wurden die „Meßwerte“ nachgerechnet, und es ergibt sich eine außerordentlich gute Übereinstimmung. Die Abweichungen übersteigen in den insgesamt zwölf Größen den Prozentsatz von 0.035% nicht, und der Mittelwert der Abweichung liegt bei 0.013%!

Diese Genauigkeit gilt für die richtige RM. Jedoch erscheint es wichtig zur Gesamteinschätzung des Verfahrens, auch den Vergleich der Meßwerte durchzuführen, die sich

Tabelle 1:

Resultierende Matrix des n-k-Profiles nach Vierpoltheorie berechnet und damit „vorgegeben“:

$$\|M\|_{1 \rightarrow 2} = \begin{vmatrix} (-2.5138, -3.228) & (-30.326, -134.82) \\ (-0.015026, -0.003752) & (-0.55545, -0.13798) \end{vmatrix}$$

Herkunfts- bzw. Abschlußmedien (nichtabsorbierend):

$$n(1a)=1; n(1b)=1.5; n(2a)=3.5; n(2b)=4.0.$$

Rückbestimmte resultierende Matrix bezogen auf die Meßdaten ($\overline{08}$ -Bestimmung mit „2a“)

$$\|M\|_{1 \rightarrow 2} = \begin{vmatrix} (-2.503, -3.2314) & (-28.129, -136.51) \\ (-0.015012, -0.0038065) & (-0.55321, -0.14732) \end{vmatrix}$$

Vergleich der Meßwerte („vorgegeben“) mit rückberechneten Meßwerten nebst Angabe der Abweichung in %:

	vorgegeben	rückberechnet	% Abweichung
R (1a \longrightarrow 2a)	0.20036	0.20035	-0.49E-2
R (2a \longrightarrow 1a)	0.29475	0.29475	<0.10E-2
T (1a \longleftrightarrow 2a)	0.094012	0.094009	-0.32E-2
R (1b \longrightarrow 2a)	0.16353	0.1635	-1.83E-2
R (2a \longrightarrow 1b)	0.30509	0.3051	0.33E-2
T (1b \longleftrightarrow 2a)	0.098349	0.098346	-0.30E-2
R (1a \longrightarrow 2b)	0.20622	0.20623	0.49E-2
R (2b \longrightarrow 1a)	0.24443	0.2445	-2.90E-2
T (1a \longleftrightarrow 2b)	0.10073	0.10071	2.00E-2
R (1b \longrightarrow 2b)	0.1688	0.16883	1.78E-2
R (2b \longrightarrow 1b)	0.25476	0.25485	-3.50E-2
T (1b \longleftrightarrow 2b)	0.10547	0.10546	0.95E-2

mit der zweiten Matrix ergeben. Tabelle 2 erlaubt diesen Vergleich. Die Abweichungen sind hier signifikant größer und zwar mindestens um den Faktor 25, so daß es leicht erscheint, die richtige RM von der unbrauchbaren anhand eines solchen Vergleiches zu unterscheiden. Da die Abweichungen aber hier auf ein rein mathematisches Kalkül bezogen sind und nicht auf experimentelle Meßwerte, erscheint die Unterscheidungsmöglichkeit bezogen auf die Praxis in weniger günstigem Licht. Da die Abweichungen doch nur im Bereich von 0.5% bis 5.0% liegen, setzt die Unterscheidbarkeit zwischen den beiden RM voraus, daß die experimentellen Meßdaten innerhalb des Satzes der zwölf Größen in höherer Genauigkeit frei sind von systematischen und statistischen Meßfehlern. Für die spektroskopische und radiometrische Meßpraxis stellt dies eine hohe, oftmals kaum zu erfüllende Anforderung dar.

Tabelle 2:

Verworfenne Matrix des n-k-Profiles ermittelt mit den Meßdaten ($\overline{08}$ -Bestimmung mit „2a“

$$\|M\|_{1 \rightarrow 2} = \left\| \begin{pmatrix} -4.2599, 0.13627 & (-108.19, -58.851) \\ -0.009934, -0.011912 & (-0.657, -0.14428) \end{pmatrix} \right\|$$

damit zurückgerechnete Meßwerte:

R (1a \longrightarrow 2a)	0.20032	-2.0E-2	4.0
R (2a \longrightarrow 1a)	0.29474	-0.34E-2	3.4
T (1a \longleftrightarrow 2a)	0.094012	<0.1E-2	0.3
R (1b \longrightarrow 2a)	0.16349	-2.4E-2	1.3
R (2a \longrightarrow 1b)	0.30508	-0.33E-2	1.0
T (1b \longleftrightarrow 2a)	0.09834	-0.92E-2	3.0
R (1a \longrightarrow 2b)	0.19904	3.48	717.5
R (2b \longrightarrow 1a)	0.2487	5.00	280.9
T (1a \longleftrightarrow 2b)	0.10015	0.5	25.0
R (1b \longrightarrow 2b)	0.16038	0.46	48.4
R (2b \longrightarrow 1b)	0.25815	-1.7	58.6
T (1b \longleftrightarrow 2b)	0.10498	-1.3	37.1
		Abweichung in %	Faktor, um den die Abweichung vergrößert ist gegenüber dem Fall der Lösungs- matrix

Es soll deshalb auch der andere, rechnerisch etwas aufwendigere Weg diskutiert werden, unter den beiden RM die richtige zu selektieren. Dieser Weg besteht darin, auch mit dem Datensatz bezogen auf die Verwendung der Medien 1a, 1b und 2b die analoge „Suchanalyse“ der RM durchzuführen. Es muß sich dabei eine RM ergeben, die mit einer der früheren, d.h. aus dem Meßdatensatz mit 1a, 1b und 2a bestimmten beiden RM, übereinstimmt. Die praktische Verwendung dieses Verfahrens hängt naturgemäß auch davon ab, wie groß die Differenzen ausfallen. Wie der Vergleich der Tabelle 1 mit Tabelle 2 ausweist, ist der Unterschied der beiden RM, die zunächst als Paar auftreten, signifikant groß.

Tabelle 3 gibt das Ergebnis der Matrizenbestimmung unter Rückrechnung mit den Meßdaten an, wobei die Bedingungs-gleichung $|M|=1$ ausgenutzt, bzw. die Bestimmung von $\overline{08}$ durchgeführt wurde mit Hilfe des Meßdatensatzes mit dem Medium „2b“. Es ist festzustellen, daß tatsächlich die Matrize „A“ mit der ersten Matrize im „Fall 2“ (siehe Tabelle 1) in den acht Parametern mit einer Genauigkeit von im Mittel 0.5%

übereinstimmt. Die maximale Einzelabweichung beträgt 1.4%. Dagegen zeigt die Matrix „B“ eine signifikante Abweichung, die in jedem der acht Parameter 14% übersteigt, maximal 280%, und im Mittel 96.6% beträgt. Damit ist die Entscheidung für die „richtige“ Matrix eindeutig und zweifelsfrei möglich. Im vorliegenden Fall ist dies die rückgerechnete Matrix in Tabelle 1, bzw. die Matrix „A“ in Tabelle 3, die mit der Vorgabematrix in den acht Parametern mit einer mittleren Genauigkeit von 2.2% übereinstimmen. Die Abweichungen betragen mehrfach weniger als 0.1%. Dies ist eine bemerkenswert hohe Genauigkeit, die durch die Wahl einer noch kleineren Schrittweite bzw. durch eine höhere numerische Genauigkeit noch zu steigern wäre.

Tabelle 3:

Lösungsmatrizen des erfc-Profiles ermittelt mit den Meßdaten ($\overline{08}$ -Bestimmung mit „2b“)

$$\begin{array}{l} \boxed{\text{A}} \quad ||M|| = \left\| \begin{array}{cc} (-2.5089, -3.2271) & (-28.131, -136.58) \\ (-0.015024, -0.0037547) & (-0.55244, -0.14938) \end{array} \right\| \\ \boxed{\text{B}} \quad ||M|| = \left\| \begin{array}{cc} (-4.2668, -0.0085374) & (-107.08, -69.615) \\ (-0.010079, 0.011565) & (-0.67679, 0.12717) \end{array} \right\| \end{array}$$

In der Praxis natürlich wird man eine derart hohe Genauigkeit aufgrund der experimentellen Meßfehler nicht verwerten bzw. erwarten können.

Abschließend ist hier festzustellen, daß die Abweichungen bezüglich der beiden konkurrierenden Lösungsmatrizen sehr viel drastischer sind als beim entsprechenden Vergleich der mit ihnen reproduzierten Meßwerte. Damit empfiehlt sich, methodisch gesehen, der Vergleich der Matrizenpaare als Eindeutigkeitskriterium gegenüber einem Vergleich der jeweiligen rückgerechneten Meßwertsätze mit den ursprünglichen experimentellen Meßwerten.

VI. Zusammenfassung

Das Problem der eindeutigen Bestimmung der resultierenden optischen Transformationsmatrix aufgrund der experimentellen Meßdaten des optischen Reflexions- und Transmissionsvermögens wurde gelöst unter Ausnutzung des Vierpolkalküls. Die dabei auftretenden Beziehungen zwischen den komplexen Matrizenkoeffizienten und den Meßdaten wurden als Vektorgleichungen interpretiert. Damit wird es möglich, die vorliegenden Beziehungen trigonometrisch numerisch zu behandeln und in einem Mikrocomputerprogramm relativ einfacher Abfolge und kurzer Laufzeit zu einer Lösung zu führen.

Die nähere Diskussion zeigt, daß eine eindeutige Lösung nur dann zu erzielen ist, wenn die optisch inhomogene Profilplatte jeweils mit zwei unterschiedlichen und nicht-absorbierenden Medien zu beiden Seiten „abgeschlossen“ wird und entsprechende Meßdaten zur Verfügung stehen.

Dann ist jedoch die resultierende Matrix mit sehr guter Genauigkeit bestimmbar, was das Verfahren angeht. Die mittleren Abweichungen in den Matrizenparametern liegen hier nur bei 2.2%. Mit diesen Matrizenkoeffizienten werden die insgesamt zwölf Meßwerte mit einer außerordentlich hohen Genauigkeit reproduziert: Die Einzelabweichung übersteigt 0.035% nicht, und die mittlere Abweichung beträgt nur 0.013%. Eine mögliche Steigerung der Genauigkeit durch erweiterten numerischen Aufwand erscheint gemessen an den praktisch zu erwartenden spektroskopischen bzw. radiometrischen Meßfehlern nicht vordringlich.

Das im vorliegenden Fall verwendete Beispiel bezieht sich auf die praktisch relevante und wichtige Situation einer inhomogen dotierten Halbleiterschicht auf bzw. in einem Halbleiter. Dabei sind die Konzentrationsgradienten, bzw. die daraus folgenden Gradienten in den optischen Konstanten (Brechungsindex und Absorptionsindex) so groß, daß die geometrisch-optische Näherung für die Wellenausbreitung durch die „Profilplatte“ nicht mehr gültig ist.

Generell ist zu sagen, daß die vorgestellte Bestimmungsmethode der resultierenden optischen Transformationsmatrix unabhängig ist von allen Inhomogenitätsstrukturen und nur voraussetzt, daß die Materie optisch linear und nicht optisch aktiv ist. Die Ausführungen beziehen sich jedoch konkret auf ein „ebenes Problem“ mit einer Durchstrahlungsrichtung parallel zum Gradienten der optischen Inhomogenität.

Die vorgestellte Lösung des Problems der Bestimmung der resultierenden optischen Transformationsmatrix ist die Voraussetzung zur Bewältigung des Problems, die Spektralfunktionen der Koeffizienten der resultierenden Matrix zur zerstörungsfreien Bestimmung der Ortsfunktion der optischen Inhomogenität auszunutzen, indem ausschließlich optische Reflexions- und Transmissionsmessungen am Gesamtsystem benötigt werden.

Literatur

- [1] F.R. KESSLER: Optische Wirkung von Konzentrationsprofilen freier Ladungsträger in Halbleitern, Abh. der Braunschweigischen Wiss. Ges. XXXVI, 45 (1984), S. 45–85.
- [2] F.R. KESSLER: Optics with Gradients of free Carrier Concentration, in: Festkörperprobleme (Advances in Solid State Physics), Vol. 26, S. 277–308, P. Grosse (ed.), Braunschweig 1986.
- [3] R. FELDKELLER: Einführung in die Vierpoltheorie, 6. Aufl., Stuttgart 1953.
- [4] F.R. KESSLER, U. BARKOW und N. UNZNER: Optische Profilanalyse an inhomogen dotiertem bzw. ionenimplantantem Silizium, Kurzvortrag, Tagung des FA Halbleiterphysik, Münster 1987, Verhandl. DPG (VI) 22, (1987), I, HL-37.10.

Anhang A: Übertragungssymmetrie

Ein homogenes, isotropes und nicht optisch aktives Medium in der Form einer senkrecht durchstrahlten Platte der Dicke d besitzt eine (resultierende) Matrix der Form:

$$||M|| = \begin{vmatrix} \chi \bar{\varphi} & \bar{Z} \operatorname{shi} \bar{\varphi} \\ \frac{1}{\bar{Z}} \operatorname{shi} \bar{\varphi} & \chi \bar{\varphi} \end{vmatrix} \quad (A1)$$

Dabei ist das Medium charakterisiert durch seinen Wellenwiderstand \tilde{Z} bzw. durch den korrespondierenden komplexen Phasenwinkel $\tilde{\varphi}$:

$$\tilde{Z} = Z_0 \frac{1}{\tilde{n}}; \quad \tilde{\varphi} = \frac{\omega}{c} \tilde{n} \cdot d. \quad (\text{A2})$$

Die RM ist also letztlich bestimmt durch die drei reellen Parameter n, k und d .

Als „optischer Transformator“ ist diese Platte übertragungssymmetrisch, und es existieren nur drei verschiedene komplexe Matrizenkoeffizienten, denn es ist $\tilde{m}_{11} = \tilde{m}_{22}$.

Die Übertragungssymmetrie bleibt bei inhomogener Materie erhalten, solange Isotropie und optische Inaktivität weiterhin existieren. Deshalb muß auch in diesem Fall die RM reduzierbar sein auf drei komplexe Größen, also sechs voneinander unabhängige reelle Parameter. Es sind dies die komplexen Wellenwiderstände $\tilde{Z}'_1, \tilde{Z}'_2$ und der Phasenwinkel $\tilde{\varphi}'$. Dafür gelten die Zusammenhänge [3]:

$$\tilde{Z}'_1 = \sqrt{\frac{\tilde{m}_{11} \cdot \tilde{m}_{12}}{\tilde{m}_{21} \cdot \tilde{m}_{22}}}; \quad \tilde{Z}'_2 = \sqrt{\frac{\tilde{m}_{22} \cdot \tilde{m}_{12}}{\tilde{m}_{21} \cdot \tilde{m}_{11}}}$$

$$\tilde{\varphi}' = \frac{\omega}{c} \tilde{n}' \cdot d \quad (\text{A3})$$

mit

$$\begin{aligned} \chi \tilde{\varphi}' &= \sqrt{\tilde{m}_{11} \cdot \tilde{m}_{22}} \\ \text{shi } \tilde{\varphi}' &= \sqrt{\tilde{m}_{12} \cdot \tilde{m}_{21}}, \end{aligned}$$

und die RM schreibt sich dann in der Form:

$$||M|| = \left\| \begin{array}{cc} \sqrt{\frac{\tilde{Z}'_1}{\tilde{Z}'_2}} \chi \tilde{\varphi}' & \sqrt{\tilde{Z}'_1 \tilde{Z}'_2} \text{shi } \tilde{\varphi}' \\ \frac{1}{\sqrt{\tilde{Z}'_1 \tilde{Z}'_2}} \text{shi } \tilde{\varphi}' & \sqrt{\frac{\tilde{Z}'_2}{\tilde{Z}'_1}} \chi \tilde{\varphi}' \end{array} \right\|. \quad (\text{A4})$$

Will man den Phasenwinkel $\tilde{\varphi}'$ explizit angeben, so ist dies mit Hilfe der folgenden Beziehungen möglich:

$$\begin{aligned} \text{ar sh } Q &= \text{Ln}(Q + \sqrt{Q^2 + 1}) = a + ib \\ \text{mit } a &= \text{Ln}|Q| \quad \text{und } b = \alpha, \\ \text{so daß } Q &= |Q|e^{i\alpha}. \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

Hier ergibt sich also mit $Q = i \tilde{\varphi}'$:

$$\text{Re } Q = \text{Re } i \tilde{\varphi}' \quad \text{und} \quad \text{Im } Q = \text{Im } i \tilde{\varphi}'. \quad (\text{A6})$$

Die Produkte $\tilde{m}_{11} \cdot \tilde{m}_{22}$ und $\tilde{m}_{12} \cdot \tilde{m}_{21}$ sind also insofern voneinander abhängig, als sie gemeinsam die beiden reellen Größen $\text{Re}(\tilde{\varphi}')$ und $\text{Im}(\tilde{\varphi}')$ liefern.

Könnte man bezüglich des resultierenden Phasenwinkels noch von einem „mittleren komplexen Brechungsindex“ der Profilplatte der Gesamtdicke d sprechen, so ist wegen der komplexen Vorfaktoren in den Matrizenkoeffizienten $m(11)$ und $m(22)$ dennoch eine derartige Reduktion der inhomogenen Profilplatte auf eine äquivalente

homogene Platte nicht möglich. Dies geht auch bereits daraus unmittelbar hervor, daß eine homogene Platte neben der Übertragungssymmetrie immer auch die Eigenschaft der Widerstandssymmetrie in Bezug auf den Eingangswiderstand \bar{W} ($\longrightarrow 2$) besitzt, also bei Umkehrung der Durchstrahlungsrichtung bei gleichem Abschlußmedium auch den gleichen Eingangswiderstand liefert. Gerade das ist aber bei der inhomogenen Profilplatte wegen der dann zu verwendenden ungleichen (!) Umkehrmatrix [siehe Gl. (4b) in Verbindung mit Gl. (25)] nicht mehr der Fall, da jetzt $\bar{m}_{11} \neq \bar{m}_{22}$ ist.

Die resultierende optische Transformationsmatrix der inhomogenen Profilplatte ist also unter den gegebenen Umständen übertragungssymmetrisch, jedoch widerstandsunsymmetrisch im Gegensatz zu der homogenen Platte, die Symmetrie in beiden Eigenschaften besitzt.

Die Übertragungssymmetrie ist dabei, mathematisch gesprochen, jeweils umkehrbar eindeutig verknüpft mit der Aussage, daß die Determinante der optischen Transformationsmatrix gleich Eins ist.

Anhang B: Programmerläuterungen

Zur Erläuterung des Programmablaufs seien einige Hinweise auf die Berechnungsabschnitte und dabei relevante Gesichtspunkte gegeben. Die Berechnungsschritte sind:

1. Berechnung der Werte $\overline{01}$ bis $\overline{07}$ aus den jeweils sechs Meßwerten für das Begrenzungsmedium „2a“ bzw. „2b“ mit Hilfe der Gl. (6) bis (11).
2. Aufsuchen des richtigen Wertes der Größe $\overline{56}$ bzw. $\overline{58}$ in den angegebenen Grenzen nach Gl. (14) bis (16) unter Kontrolle der Bedingung $|M|=1$ in gesteuerter Schrittweite jeweils für die „Normallage“ und die „Spiegellage“. Dabei wird zu jedem Wert von $\overline{58}$ die rückgedrehte resultierende Matrix nach Gl. (33) berechnet. Die Determinante dieser Matrix ist stets reell, es braucht also nur der Betrag $=1$ abgefragt zu werden.

Eine gesteuerte Schrittweite empfiehlt sich im Programmablauf zur Zeitersparnis, da der Durchgang der Funktion $ABS(|M|)=1$ als $f(\overline{56})$ sehr steil ist (siehe Abb. 4b). Andererseits ist hierdurch gerade die hohe Reproduktionsgenauigkeit des gesamten Verfahrens der Matrizenrekonstruktion gegeben.

Dieser 2. Rechnungsschnitt erfolgt bei einem beliebig vorgegebenen Wert für den Winkel φ , da dieser Winkel den Betrag der Determinante von $||M||$ nicht ändert.

Für die „Normallage“ ist der Winkel β erforderlich, der nach

$$\beta = \arccos \left(\frac{\overline{05}^2 + \overline{08}^2 - \overline{58}^2}{2 * \overline{05} * \overline{08}} \right) \quad (B1)$$

zu berechnen ist.

Die in Gl. (B1) benötigte Größe $\overline{08}$ ist ihrerseits durch die Größe $\overline{58}$ festgelegt aufgrund der Beziehung:

$$\overline{08} = [\overline{58}^2 + \overline{05}^2 - 2 * \overline{58} * \overline{05} \cos \gamma]^{1/2} \quad (B2)$$

mit $\gamma = \arccos [\overline{05}^2 - \overline{06}^2 + \overline{56}^2 / (2 * \overline{05} * \overline{56})]$.

Diese Rechnungen sind jeweils mit den Meßdaten bezogen auf das Abschlußmedium „2a“ und „2b“ durchzuführen.

3. Der nächste Schritt ist die Kombination der bisherigen Daten im Sinne von Gl. (30) und (31). Mit den sich dabei ergebenden vier „passenden“ Werten des komplexen Koeffizienten/Vektors v werden die zwei Paare der resultierenden Matrizen berechnet. Zunächst ist mit dem Betrag von v gemäß Gl. (32a bzw. b) der Winkel φ gegeben. Ferner geht u unmittelbar aus v hervor gemäß Gl. (19). Die Werte für w und x ergeben sich aus einfachen Komponentenbetrachtungen in Folge der Überlegungen zu Gl. (20) ff.

Die beiden übereinstimmenden Matrizen in den beiden Paaren stellen das Endresultat dar.